Температурная зависимость химического потенциала и заселенности уровня Ландау двумерного электронного газа в постоянном магнитном поле

Б.Т. Абдулазизов*

Физико-технический институт АН РУз, ул. Ч. Айтматова 2б, 100084, Ташкент, Узбекистан

Получена 11.08.2021

* Corresponding author: e-mail bt_abdulazizov@mail.ru, Phone: +998 91 186 06 05

Проведен численный расчет температурной зависимости химического потенциала при различных значениях фактора заполнения ν уровня Ландау. Найдена степень заполнения каждого уровня Ландау в зависимости от температуры. Приведена также низкотемпературная формула зависимости $\mu(T/\Gamma, \varepsilon_F)$ на основе разложения Зоммерфельда. Обсуждается влияние теплового возбуждения, происходящего как внутри, так и между уровнями Ландау, на химический потенциал и заселенности уровней данной системы.

Ключевые слова: гереструктура, квантовая яма, двумерный электронный газ, заселенность уровня Ландау, магнитная осцилляция, химический потенциал, разложение Зоммерфельда, меж- и внутриуровневые возбуждения.

A numerical calculation of the temperature dependence of the chemical potential for various values of the filling factor ν of the Landau level is carried out. The degree of filling of each Landau level is found as a function of temperature. A low-temperature formula for the dependence of $\mu(T/\Gamma, \varepsilon_F)$ based on the Sommerfeld expansion is also given. The influence of the intra- and interlevel thermal excitations on changes in the chemical potential with temperature is discussed.

Keywords: heterostructure, quantum well, two dimensional electron gas, Landau level population, magnetic oscillations, chemical potential, expansion of Sommerfeld, inter- and intralevel excitations.

https//doi.org/10.52304/.v23i2.235

I. Введение

При наличии магнитного поля, приложенного перпендикулярно плоскости квантовой ямы, спектр носителей становится полностью дискретным [1, 2]. С изменением магнитного поля меняется положение уровней Ландау, расстояния между ними, а также кратность вырождения уровней. Когда уровень Ферми пересекает уровень Ландау, ряд термодинамических величин резко изменяются. Это наблюдается в магнитных осцилляционных явлениях, н-р, осцилляции магнетосопротивлении, восприимчивости, химического потенциала, намагниченности, теплоемкости и.т.д. [1-4]. Из наблюдаемых осцилляций можно определить важную информацию о зонных параметрах структуры, таких как эффективная масса, концентрация, спиновые расщепления и.т.д.

До настоящего время проведено огромное количество теоретических расчетов, которые посвящены изучению термодинамических величин в зависимости величины магнитного поля B, температуры T, концентрации электронов в квантовой яме n_S, а также уширению уровня Γ, н-р [5-8].

В общем случае для таких расчетов требуются численные методы.

Ниже будем интересоваться изменением химического потенциала при фиксированном значении магнитного поля. Такая зависимость приведена в работе [7] для электронного газа в квантовой яме GaAs. Из этой зависимости следует, что последний заселенный уровень Ландау заполнен точно наполовину (н-р, для второго уровня фактор заполнения $\nu = 2.5$, для четвертого уровня $\nu = 4.5$), химический потенциал не меняется с температурой.

В случае $\nu > 2.5$ химический потенциал растет, а в случае $\nu < 2.5$ уменьшается нелинейно по T, пока $k_BT/\Gamma<10$, здесь k_B – константа Больцмана. Но при дальнейшем росте температуры $k_BT/\Gamma>10$, обе зависимости с $\nu \neq 2.5$ также постепенно становятся не зависящими от T. Таким образом, при температурах $k_BT/\Gamma>10$ зависимость химического потенциала от температуры отсутствует и полагается $d\mu/dT = 0$.

Цель данной работы – изучить зависимости $\mu(T)$ при различных значениях фактора заполнения ν в широком интервале температур. Определить заполнение каждого уровня Ландау в зависимости от температуры. Обсудить влияние теплового возбуждения, происходящего как внутри, так и между уровнями Ландау, на изменение химического потенциала с температурой.

II. Модель

Для заданной температуры T, концентрации n_S, параметра уширении уровня Γ и магнитного поля B химический потенциал 2D-электронного газа $\mu(T, B, \Gamma)$ можно найти из следующих уравнений [5, 6, 8]

$$n_S = D\hbar\omega\sum_n \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Gamma}\exp\left[-\frac{(\varepsilon-\varepsilon_n)^2}{2\Gamma^2}\right] f(\varepsilon,\mu,T)d\varepsilon\,. \tag{1}$$

Здесь

$$f(\varepsilon,\mu,T) = \frac{1}{\exp[(\varepsilon-\mu)/T]+1} \tag{2}$$

функция распределения Ферми-Дирака, в которой для упрощения полагали $k_B = 1$, при этом $k_BT \to T$, ε_n – энергетические уровни Ландау (спиновое расщепление уровня не будем учитывать) и $\hbar\omega$ – циклотронная энергия.

$$\varepsilon_n = (n + (1/2))\hbar\omega,$$
$$\hbar\omega = \hbar\frac{eB}{m^*} = \frac{1.16\times10^{-4}}{m^*/m_0}B\left[\frac{\text{eV}}{\text{T}}\right], \tag{3}$$

m^* – эффективная масса электрона. D – двумерная плотность состояния подзоны в отсутствие магнитного поля, которая связана с $\hbar\omega$ соотношением

$$D\hbar\omega = \frac{eB}{\pi\hbar},$$
$$D = \frac{m^*}{\pi\,\hbar^2} = \frac{m^*}{m_0}413\times10^{12},\ [\text{eV}\cdot\text{cm}^2] \tag{4}$$

Фактор заполнения ν определяется как $\nu = n_S/D\hbar\omega$.

Известно, что высокие температуры и/или большие значения параметра уширения $\Gamma \sim \hbar\omega$ сильно подавляют амплитуды осцилляции. Используемые ниже в расчетах значения уширения уровня Ландау ограничены условием $\Gamma \le 0.1\,\hbar\omega$. Это означает, что гауссианы соответствующих различных уровней заметно не перекрываются. Тщательные тестовые расчеты показывают, что в этих условиях уравнение (1) можно переписать в виде

$$n_S = D\hbar\omega\sum_n \int_{\varepsilon_n-\frac{\hbar\omega}{2}}^{\varepsilon_n+\frac{\hbar\omega}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Gamma}\exp\left[-\frac{(\varepsilon-\varepsilon_n)^2}{2\Gamma^2}\right] f(\varepsilon,\mu,T)d\varepsilon \tag{5}$$

В такой форме записи, очевидно, что степень заполнения отдельно взятого уровня Ландау f_n с хорошей точностью равна

$$f_n = \int_{\varepsilon_n-\hbar\omega/2}^{\varepsilon_n+\hbar\omega/2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Gamma}\exp\left[-\frac{(\varepsilon-\varepsilon_n)^2}{2\Gamma^2}\right] f(\varepsilon,\mu,T)d\varepsilon\,,$$
$$\nu = \sum_n f_n\,. \tag{6}$$

Ниже все расчеты проводятся на примере материала GaAs. Некоторые параметры расчетов указаны непосредственно на графиках.

III. Осцилляции $\mu(B)$ при разных температурах

Обсудим осцилляции $\mu(B)$ для трех значений температуры T = 1, 10, 20 K. Обычно экспериментальные температуры имеют значение порядка единиц Кельвина. Для того чтобы осцилляционные зависимости четко различались, здесь

©Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2021 г.

использованы разные порядки значений температуры. Результаты расчетов этих зависимостей представлены на рис. 1. Из графика видно, что при значении магнитного поля, соответствующем полуцелому фактору заполнения уровня (ν = 1.5, 2.5, 3.5), химический потенциал не зависит от температуры. Справа от этих точек, где фактор заполнения меньше половинного заполнения, химический потенциал уменьшается с температурой. Слева, где фактор заполнения больше половинного заполнения, химический потенциал, наоборот, растет с температурой.

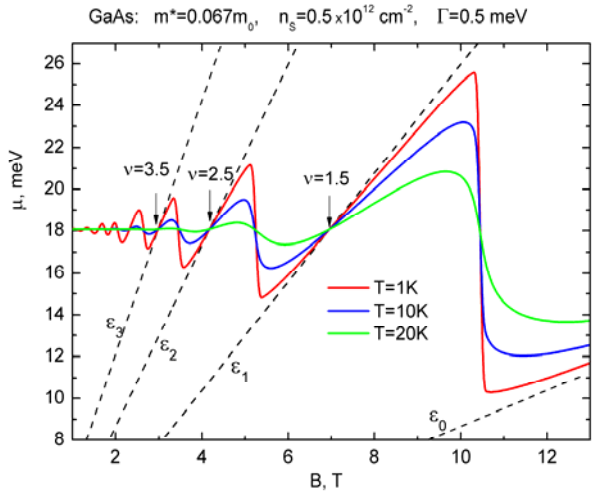


Рисунок 1. Осцилляции химического потенциала 2D-электронного газа в квантовой яме GaAs в зависимости от магнитного поля B при постоянном Γ=0.5 meV для трех значений температуры T = 1, 10, 20 K. Стрелками указаны точки, соответствующие полуцелому фактору заполнения. Штриховые прямые – уровни Ландау.

Таким образом, если величина магнитного поля фиксирована, то температурная зависимость химического потенциала 2D-электронного газа зависит от значений фактора заполнения ν.

IV. Температурная зависимость химического потенциала

Пусть энергия Ферми лежит внутри уровня Ландау с номером M : $\varepsilon_F \sim \varepsilon_M$. Предполагается, что температура достаточно низка $T << \Gamma < \hbar\omega$ и все нижние $M-1$ уровни полностью заполнены, и их концентрации не меняются с температурой, верхние уровни $n > M$ пусты. Нас интересует изменение химического потенциала внутри уровня M, и для него на основе (1) можно написать уравнение

$$\int_0^{\varepsilon_F} \exp\left[-\frac{(\varepsilon-\varepsilon_M)^2}{2\Gamma^2}\right] d\varepsilon = \int_0^{\infty} \exp\left[-\frac{(\varepsilon-\varepsilon_M)^2}{2\Gamma^2}\right] f(\varepsilon,\mu,T)d\varepsilon \quad (7)$$

Левая часть этого уравнения получается из (1) при $T=0$. Для правой части (7) применяем разложение Зоммерфельда [9]

$$\int_0^{\infty} g(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \approx \int_0^{\mu} g(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} g'(\mu) T^2, \quad g(\varepsilon) = \exp\left[-\frac{(\varepsilon-\varepsilon_M)^2}{2\Gamma^2}\right]. \quad (8)$$

Условие $T << \Gamma$ позволяет считать плотность состояний $g(\varepsilon)$ медленно меняю-щейся функцией по сравнению с $f(\varepsilon, E)$. Вычислив интеграл, сохранив первый член разложения по степеням $x = \mu - \varepsilon_F$, после неко-торых упрощений имеем

$$\mu \approx \varepsilon_F + \frac{\pi^2}{6}(\varepsilon_F - \varepsilon_M)\left(\frac{T}{\Gamma}\right)^2, \quad T << \Gamma, \quad \mu \sim \varepsilon_F. \quad (9)$$

Из этой формулы следует, что в случае $\varepsilon_F > \varepsilon_M$ химический потенциал квадратично растет с температурой, в противном случае, когда $\varepsilon_F < \varepsilon_M$, он уменьшается. Это связано с поведением плотности состояний $g(\varepsilon)$, которая монотонно растет, когда $\varepsilon_F < \varepsilon_M$, уменьшается, если $\varepsilon_F > \varepsilon_M$.

Формула (9) предсказывает низкотемпературное поведение химического потенциала при известном значении энергии Ферми ε_F. Чтобы найти ε_F как функцию чисел заполнения $\nu(n_S, B)$ необходимо решить уравнение (1) при $T = 0$. Вычислив интеграл, после некоторых упрощений имеем

$$\nu = \frac{1}{2}\sum_{n=0}^{N}\left[\mathrm{erf}\left(\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_n}{\sqrt{2}\Gamma}\right) + \mathrm{erf}\left(\frac{\varepsilon_n}{\sqrt{2}\Gamma}\right)\right]. \quad (10)$$

Если учесть, что нижние уровни $n < M$ практически заполнены полностью, суммирование в (10) упрощается, и имеем

$$\nu = M + \frac{1}{2}\left[\mathrm{erf}\left(\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_M}{\sqrt{2}\Gamma}\right) + \mathrm{erf}\left(\frac{\varepsilon_M}{\sqrt{2}\Gamma}\right)\right], \quad M = [\nu]. \quad (11)$$

Наконец, при заданном значении ν зависимость $\mu(T)$ можно найти из системы уравнений (9) и (11) (исключив ε_F численно).

©Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2021 г.

График этой зависимости показан на рис. 2 (точки). Также на рис. 2 представлены температурные зависимости химического потенциала, найденные численным решением уравнения (1) при Γ = 0.6 meV для различных значений чисел заполнения ν.

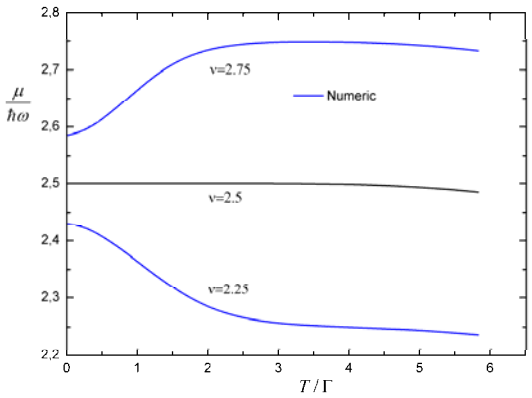


Рисунок 2. Зависимость химического потенциала 2D-электронного газа от температуры для трех значений чисел заполнения ν = 2.25, 2.5, 2.75.

Из графика видно, что при достаточно низких температурах $T \ll \Gamma$, когда энергия Ферми лежит внутри уровня Ландау, электронный газ действительно ведет себя металлически. При больших температурах $T \gg \Gamma$ влияние уширения уровня незаметно. С дальнейшим ростом температуры, химический потенциал медленно уменьшается. Это связано с тепловым переходом электронов между уровнями Ландау, его интенсивность экспоненциально мала $\sim \exp(-\hbar\omega / T)$.

V. Температурная зависимость заселенности уровни Ландау

При изменении температуры меняются относительные заселенности уровней Ландау. С помощью уравнения (6) можно определить заселенности каждого уровня в зависимости от T, Γ, ν. Графики этих зависимостей представлены на рис. 3, где энергия Ферми лежит вблизи второго уровня Ландау.

Поскольку Γ > 0, на данном уровне возможно внутриуровневое тепловое возбуждение, которое на графике не проявляется. Когда $T < \Gamma$, в графиках зависимость заселенности уровней от температуры не наблюдается из-за экспоненциальной малости $\sim \exp(-\hbar\omega / T)$. Она проявляется в области $T > \Gamma$, причем характер изменений зависит от значений чисел заполнения ν данного (второго) уровня. Зависимость от температуры

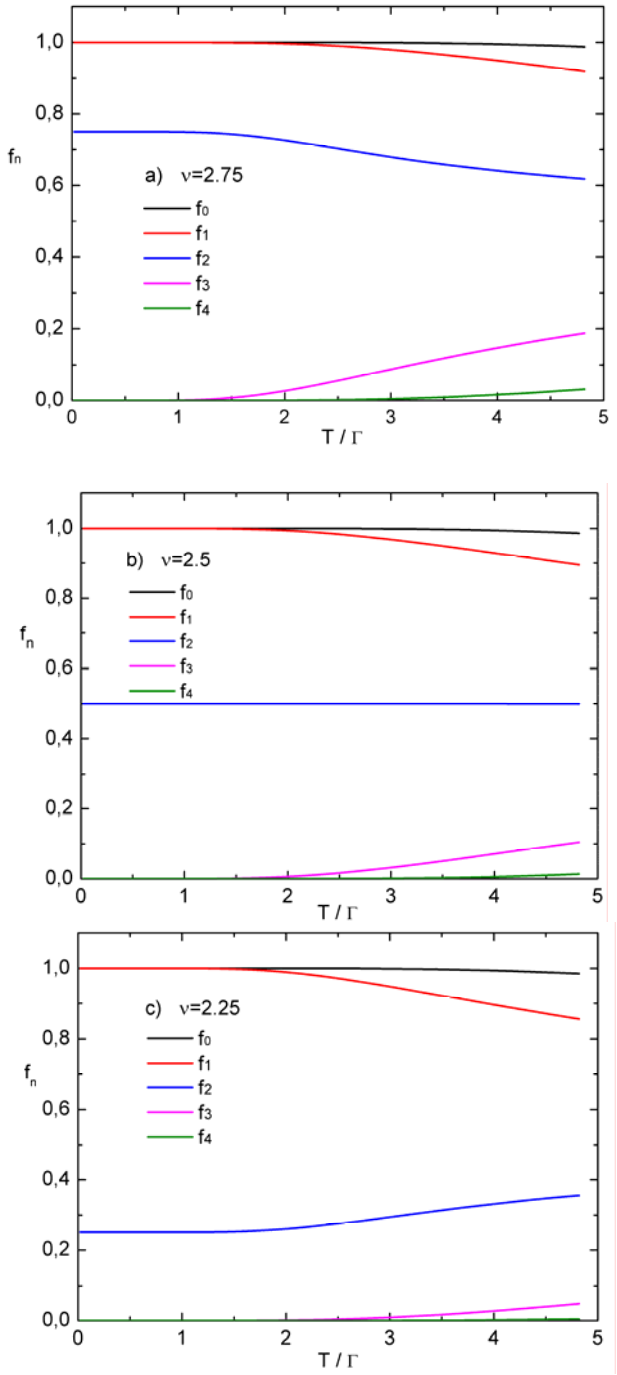


Рисунок 3. Зависимости относительных заселенностей уровней Ландау от температуры для трех значений чисел заполнения ν = 2.75 (*a*), 2.5 (*b*), 2.25 (*c*) для GaAs. Принято: $m^* = 0.067\ m_0$, $n_S = 0.36\times10^{12}$ cm^{-2}, Γ = 0.5 meV.

©Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2021 г.

заселенности уровней f_n, в основном, наблюдается для 2-го уровня и соседних ему 1-го и 3-го уровней.

В случае (*a*) второй уровень Ландау заполнен больше половины, ν = 2.75, энергия Ферми лежит выше второго энергетического уровня $\varepsilon_F > \varepsilon_2$. С ростом температуры, начиная с $T \geq \Gamma$, доминируют тепловые переходы между уровнями $\varepsilon_2 \to \varepsilon_3$. При этом, как видно из рис. 3(*a*), заселенность 2-го уровня f_2 уменьшается, а 3-го уровня f_3 растет, заселенность 1-го уровня начинает меняться позднее. Причина наблюдения такой картины заключается в следующем: интенсивность тепловых переходов пропорциональна заселенности начальных f_i и количеству свободных конечных f_F состояний. Поэтому тепловые переходы 2→3 интенсивнее, чем переходы 1→2.

Аналогично можно судить и о случае (*c*), (рис. 3), в котором 2-й уровень заполнен менее половины ν = 2.25. Здесь тепловые переходы 1→2 интенсивнее, чем переходы 2→3, и поэтому они проявляются раньше при температурах $T \geq \Gamma$.

В случае (*b*) (рис. 3) 2-й уровень заполнен ровно наполовину ν = 2.5. Интенсивности тепловых переходов 1→2 и 2→3 равны. Число электронов, покидающих 2-й уровень и переходящих на 3-й уровень, полностью компенсируется электронами, переходящими из 1-го. Поэтому заселенность 2-го уровня f_2 не меняется с температурой.

VI. Заключение

В данной работе кратко рассмотрено изменение химического потенциала при фиксированном значении магнитного поля, $\mu(T)|_B$, при различных значениях фактора заполнения ν в широком интервале температур. Наряду с численными результатами, приводится и сравнивается низкотемпературная аналитическая формула (см. рис. 2).

Отметим, что низкотемпературная формула, описывающая зависимости $\mu(T/\Gamma, \varepsilon_F)$ (9) на основе разложения Зоммерфельда, найдена и использована для обсуждения осцилляции теплоемкости в работе [10]. Эта формула предсказывает низкотемпературное поведение химического потенциала при известном значении энергии Ферми ε_F. Мы привели и уравнение (10), которое выражает ε_F через числа заполнения $\nu(n_S, B)$. Это уравнение является трансцендентным, дальнейшие упрощения нами не удались.

Представлены также графики зависимости от температуры заселенности уровня Ландау для различных значений фактора заполнения (см. рис. 3). Обсуждены причины проявления таких зависимостей.

Метаданные

The temperature dependence of the chemical potential and the population of the Landau levels of two dimensional electron gas in constant magnetic field

B.T. Abdulazizov

Physical-Technical Institute, Uzbekistan Academy of Sciences, Chingiz Aytmatov street 2B, 100084, Tashkent, Uzbekistan

A numerical calculation of the temperature dependence of the chemical potential for various values of the filling factor ν of the Landau level is carried out. The degree of filling of each Landau level is found as a function of temperature. A low-temperature formula for the dependence of $\mu(T/\Gamma, \varepsilon_F)$ based on the Sommerfeld expansion is also given. The influence of the intra- and interlevel thermal excitations on changes in the chemical potential with temperature is discussed.

Keywords: heterostructure, quantum well, two dimensional electron gas, Landau level population, magnetic oscillations, chemical potential, expansion of Sommerfeld, inter- and intralevel excitations

Литература (References)

[1] T. Ando, A.B. Fowler, F. Stern. Electronic properties of two-dimensional systems. Rev. Mod. Phys. **54**, 437 (1982).

[2] L.L. Chang. Electron properties of semiconductor heterostructures in magnetic field. In: Molecular Beam Epitaxy and Heterostructures, edited by L.L. Chang and K. Ploog (Martinus Nijhoff, Dordrecht, 1985).

[3] M. Grundmann. The Physics of Semiconductors. An Introduction Including Devices and Nanophysics (Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg 2006), p 689.

[4] E. Gornik, R. Lassnig, G. Strasser, H.L. Stormer, A.C. Gossard, and W. Wiegmann. Specific heat of two-dimensional electrons in GaAs-GaAlAs multilayers. Physical Review Letters **54**, No.16, 1820-1823 (1985).

[5] A.C.A. Ramos, G.A. Farias, N.S. Almeida. Thermodinamics of a quasi-two dimensional electron gas: Effects of magnetic fields, temperature and finite width. Physics E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures **43**, 1878-1881 (2011).

[6] W. Zawadzki, R. Lassnig. Magneto-thermal effect and thermoelectric power of two-dimensional electron gas in a

©Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2021 г.

quantizing magnetic field. Surface Science **142**, 225-235 (1984).
[7] Cristine Villagonzalo, Rayda Gammag. The intrinsic features of the specific heat at half-filled Landau levels of two-dimensional electron systems. J. Low-Temp. Phys. **163**, 43-52 (2011). doi 10.1007/s10909-010-0259-3
[8] I. Fezai, S. Jaziri. Thermodynamic properties of Landau levels in InSb two-dimensional electron gas. Superlattices and Microstructures **59**, 60-65 (2013).
[9] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin. Solid State Physics (Holt, Rinehart and Winston, NewYork, 1976).
[10] L. Wang. Magneto-oscillations in a two-dimensional electron gas: a simplified analytic formulation. Physics Letters **2**, No.2, 191-197 (1989).

Доимий магнит майдонида икки ўлчамли электрон газининг кимёвий потенциали ва Ландау сатҳларига температурани боғлиқлиги

Б.Т.Абдулазизов

ЎзР ФА Физика-техника институти, Ч. Айтматов кўчаси 2б, 100084, Тошкент, Ўзбекистон

Ландау сатҳини тўлдириш фактори ν нинг турли қийматларида кимёвий потенциални температурага боғланишини сонли ҳисоблари ўтказилган. Температурага боғлиқ равишда ҳар бир Ландау сатҳини тўлдирилиш даражаси топилгин. Зоммерфельд ёйилмаси асосида паст температураларда $\mu(T/\Gamma, \varepsilon_F)$ боғланиши формуласи ҳам келтирилган. Ландау сатҳлари ичидаги ҳамда сатҳлараро иссиқлик уйғонишларини кимёвий потенциалга ва қаралаётган системани сатҳларини тўлдирилиш даражасига таъсири муҳокама қилинган.

Калит сўзлар: гетероўтишлар, квант ўра, икки ўлчамли электрон газ, Ландау сатҳлари, магнит осцилляцияси, сатҳлар кенглиги, кимёвий потенциал, Зоммерфельд ёйилмаси, сатҳлараро уйғонишлар, сатҳлар ичидаги уйғонишлар, сатҳлар тўлалиги.

©Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2021 г.